Unidad II: Solución Numérica de Ecuaciones No Lineales.

José Luis Ramírez B.

November 18, 2024

Motivación.

- La determinación de las raíces de una ecuación o de un sistema de ecuaciones, es uno de los problemas más antiguos de aproximación numérica que se presenta con frecuencia en la solución de una gran variedad de problemas en la matemática aplicada.
- En un problema más general, si f es una función cualquiera, la ecuación $f(x) = 0$ no puede resolverse analíticamente. De hecho, ni siquiera se sabe a priori cuántos ceros tiene f: ¿varios, uno, ninguno?

Motivación.

La ecuación de Peng-Robinson es una ecuación de estado que proporciona la presión P de un gas mediante:

$$P = \frac{R * T}{V - b} - \frac{a}{V * (V + b) + b * (V - b)} \tag{1}$$

donde a y b son constantes, T es la temperatura absoluta a la que se encuentra el gas, V es el volumen específico y R es la constante de los gases perfectos $(8.31441 J/(mol.^{\circ}K))$. Para el CO_2 las constantes a y b toman los valores $a = 364.61 m^6.kPa/(kg.mol)^2$ y $b = 0.02664 m^3/kg.mol$. Supongamos que se desea encontrar la densidad $(1/V)$ del CO_2 a una presión de $10^4 kPa$ y a una temperatura de $340^{\circ}K$ usando la ecuación de Peng- Robinson.

Dos casos importantes:

Dos casos importantes:

1. Solución de una ecuación no lineal con una incógnita, donde:

$$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$

   La solución es un escalar x para el cual $f(x) = 0$

Dos casos importantes:

1. Solución de una ecuación no lineal con una incógnita, donde:

$$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$

   La solución es un escalar x para el cual $f(x) = 0$

2. Solución a un sistema acoplado de n ecuaciones no lineales en las n incógnitas, donde:

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$$

   La solución es un vector x para el cual todas las componentes de f son cero simultáneamente, $f(x) = 0$

Ejemplos:

Ejemplos:

1. Ecuación no lineal en una dimensión

$$x^2 - 4\sin(x) = 0$$

para la cual $x = 1.9$ es una solución aproximada.

Ejemplos:

1. Ecuación no lineal en una dimensión

$$x^2 - 4\sin(x) = 0$$

para la cual $x = 1.9$ es una solución aproximada.

2. Sistema de ecuaciones no lineales en dos dimensiones

$$\left\{ \begin{array}{rcl} x_1^2 - x_2 + 0.25 & = & 0 \\ -x_1 + x_2^2 + 0.25 & = & 0 \end{array} \right.$$

para el cual el vector solución es $x = [0.5, 0.5]^t$

Ejemplo: Una dimensión

Ecuaciones no lineales pueden tener cualquier número de soluciones

Ejemplo: Una dimensión

Ecuaciones no lineales pueden tener cualquier número de soluciones

- $e^x + 1 = 0$ no posee solución.

Ejemplo: Una dimensión

Ecuaciones no lineales pueden tener cualquier número de soluciones

- $e^x + 1 = 0$ no posee solución.
- $e^{-x} - x = 0$ tiene una solución.

Ejemplo: Una dimensión

Ecuaciones no lineales pueden tener cualquier número de soluciones

- $e^x + 1 = 0$ no posee solución.
- $e^{-x} - x = 0$ tiene una solución.
- $x^2 - 4\sin(x) = 0$ posee dos soluciones.

Ejemplo: Una dimensión

Ecuaciones no lineales pueden tener cualquier número de soluciones

- $e^x + 1 = 0$ no posee solución.
- $e^{-x} - x = 0$ tiene una solución.
- $x^2 - 4\sin(x) = 0$ posee dos soluciones.
- $x^3 + 6x^2 + 11x - 6 = 0$ posee tres soluciones.

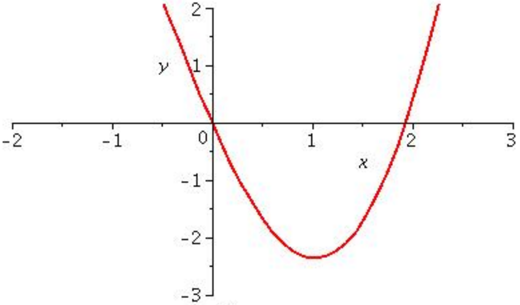
Ejemplo: Una dimensión

Ecuaciones no lineales pueden tener cualquier número de soluciones

- $e^x + 1 = 0$ no posee solución.
- $e^{-x} - x = 0$ tiene una solución.
- $x^2 - 4\sin(x) = 0$ posee dos soluciones.
- $x^3 + 6x^2 + 11x - 6 = 0$ posee tres soluciones.
- $\sin(x) = 0$ posee infinitas soluciones.

El Método Gráfico

El método gráfico es un método muy simple, consiste en calcular valores de la variable dependiente para distintos valores de la variable independiente, para luego observar el punto de intersección de la función con el eje de las abscisas. Este punto proporciona una primera aproximación a la raíz de la ecuación.



$y = x^2 - 4\sin(x)$

Solución de Ecuaciones No Lineales

Definición

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función no lineal. Se llama raíz o cero de la ecuación no lineal $f(x) = 0$ a todo valor $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que $f(\alpha) = 0$.

Se podrían precisar tres etapas en el cálculo de un cero:

- Localización: Existencia de las raíces.

Solución de Ecuaciones No Lineales

Definición

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función no lineal. Se llama raíz o cero de la ecuación no lineal $f(x) = 0$ a todo valor $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que $f(\alpha) = 0$.

Se podrían precisar tres etapas en el cálculo de un cero:

- Localización: Existencia de las raíces.
- Separación: Aislar raíces en caso de la existencia de varias.

Solución de Ecuaciones No Lineales

Definición

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función no lineal. Se llama raíz o cero de la ecuación no lineal $f(x) = 0$ a todo valor $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que $f(\alpha) = 0$.

Se podrían precisar tres etapas en el cálculo de un cero:

- Localización: Existencia de las raíces.
- Separación: Aislar raíces en caso de la existencia de varias.
- Aproximación Numérica: Generación de una sucesión convergente a la raíz α.

Solución de Ecuaciones No Lineales

Definición

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función, $\alpha \in \mathbb{R}$ es un cero de f de multiplicidad $p \in \mathbb{Z}$, si

$$f(x) = (x - \alpha)^p q(x)$$

con $q(\alpha) \neq 0$.

Solución de Ecuaciones No Lineales

Definición

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función, $\alpha \in \mathbb{R}$ es un cero de f de multiplicidad $p \in \mathbb{Z}$, si

$$f(x) = (x - \alpha)^p q(x)$$

con $q(\alpha) \neq 0$.

Si $f(\alpha) = f'(\alpha) = f''(\alpha) = \cdots = f^{(m-1)}(\alpha) = 0$ pero $f^{(m)}(\alpha) \neq 0$, entonces la raíz α posee multiplicidad m

Ratas de Convergencia

Suponiendo que un método iterativo produce una sucesión de puntos $x_1, x_2, x_3, \ldots$ a partir de un punto inicial x_0. Se quiere conocer si converge a la solución α y cual es la rapidez con que lo hace.

Definición

La sucesión $\{x_n\} \subset \mathbb{R}$ converge a $\alpha \in \mathbb{R}$ si

$$\lim_{n\to\infty} |x_n - \alpha| = 0$$

Sea $e_n = x_n - \alpha$. Si existen dos constantes $\lambda > 0$ y $r > 0$ tales que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^r} = \lambda$$

se dice que $\{x_n\}$ converge hacia α, con orden de convergencia r y λ se denomina la constante asintótica del error..

Ratas de Convergencia

Algunos casos de interés

Ratas de Convergencia

Algunos casos de interés

- $r = 1$: lineal ($\lambda < 1$)

Ratas de Convergencia

Algunos casos de interés

- $r = 1$: lineal ($\lambda < 1$)
- $r > 1$: superlineal

Ratas de Convergencia

Algunos casos de interés

- $r = 1$: lineal ($\lambda < 1$)
- $r > 1$: superlineal
- $r = 2$: cuadrático

Ratas de Convergencia

Algunos casos de interés

- $r = 1$: lineal ($\lambda < 1$)
- $r > 1$: superlineal
- $r = 2$: cuadrático

Rata de Convergencia	Dígitos ganados por iteración
lineal	constante
superlineal	incrementándose
cuadrática	doble

Método de Bisección

Teorema del valor intermedio de Bolzano.

Supongamos que $f \in C[a, b]$ y que L es cualquier número entre $f(a)$ y $f(b)$. Entonces existe un número c en (a, b) tal que $f(c) = L$.

Método de Bisección

- Supongamos que f es una función continua en un intervalo $[a, b]$, y $f(a) \cdot f(b) < 0$. Entonces, por el Teorema de Bolzano, existe al menos un $p \in (a, b)$, tal que $f(p) = 0$.

Método de Bisección

- Supongamos que f es una función continua en un intervalo $[a, b]$, y $f(a) \cdot f(b) < 0$. Entonces, por el Teorema de Bolzano, existe al menos un $p \in (a, b)$, tal que $f(p) = 0$.
- Una primera aproximación de este punto $p*$ puede ser el punto medio:

$$p_1 = \frac{a + b}{2}$$

Método de Bisección

- Dado que la función es continua, si $f(a) \cdot f(p_1) < 0$ en el intervalo $[a, p_1]$ habrá al menos una solución de la ecuación.

Método de Bisección

- Dado que la función es continua, si $f(a) \cdot f(p_1) < 0$ en el intervalo $[a, p_1]$ habrá al menos una solución de la ecuación.
- Y si $f(a) \cdot f(p_1) > 0$ en el intervalo $[p_1, b]$ existirá al menos una raíz.

Método de Bisección

- Dado que la función es continua, si $f(a) \cdot f(p_1) < 0$ en el intervalo $[a, p_1]$ habrá al menos una solución de la ecuación.
- Y si $f(a) \cdot f(p_1) > 0$ en el intervalo $[p_1, b]$ existirá al menos una raíz.
- Por tanto se habrá definido un nuevo intervalo $[a_1, b_1]$ en el que existirá una solución. Al que puede aplicársele nuevamente el proceso anterior.

Método de Bisección

En general, partiendo de un intervalo $[a_j, b_j]$ en el que $f(a_j) \cdot f(b_j) < 0$ se denotará por p_{j+1} al punto medio del intervalo:

$$p_{j+1} = \frac{a_j + b_j}{2}$$

procediendo de la forma siguiente:

- Si $f(p_{j+1}) = 0$ se habrá obtenido una solución de la ecuación: el punto p_{j+1}.

Método de Bisección

En general, partiendo de un intervalo $[a_j, b_j]$ en el que $f(a_j) \cdot f(b_j) < 0$ se denotará por p_{j+1} al punto medio del intervalo:

$$p_{j+1} = \frac{a_j + b_j}{2}$$

procediendo de la forma siguiente:

- Si $f(p_{j+1}) = 0$ se habrá obtenido una solución de la ecuación: el punto p_{j+1}.
- Si $f(a_j) \cdot f(p_{j+1}) < 0$ se denotará por: $a_{j+1} = a_j$ y por $b_{j+1} = p_{j+1}$.

Método de Bisección

En general, partiendo de un intervalo $[a_j, b_j]$ en el que $f(a_j) \cdot f(b_j) < 0$ se denotará por p_{j+1} al punto medio del intervalo:

$$p_{j+1} = \frac{a_j + b_j}{2}$$

procediendo de la forma siguiente:

- Si $f(p_{j+1}) = 0$ se habrá obtenido una solución de la ecuación: el punto p_{j+1}.
- Si $f(a_j) \cdot f(p_{j+1}) < 0$ se denotará por: $a_{j+1} = a_j$ y por $b_{j+1} = p_{j+1}$.
- Si $f(a_j) \cdot f(p_{j+1}) > 0$ se denotará por: $a_{j+1} = p_{j+1}$ y por $b_{j+1} = b_j$.

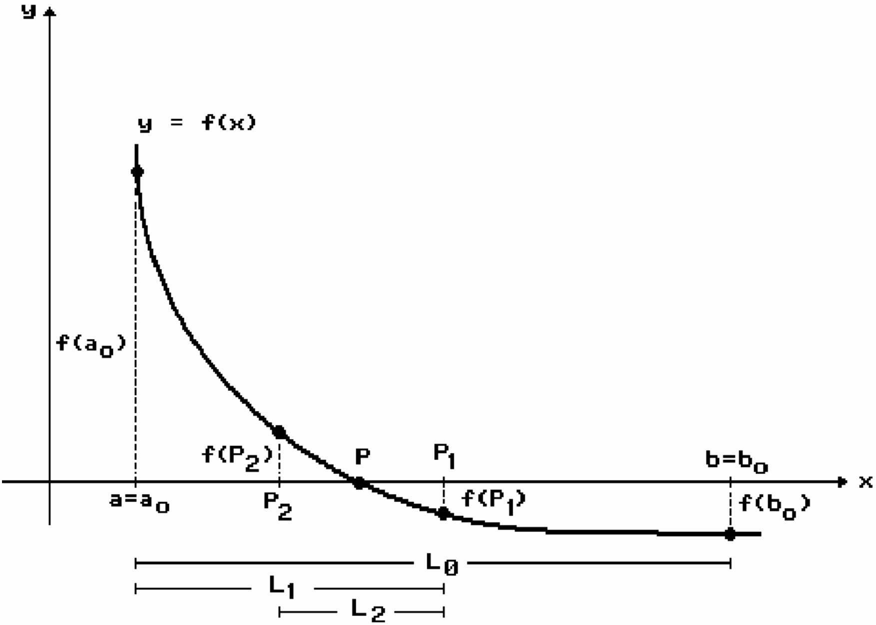
Método de Bisección

En general, partiendo de un intervalo $[a_j, b_j]$ en el que $f(a_j) \cdot f(b_j) < 0$ se denotará por p_{j+1} al punto medio del intervalo:

$$p_{j+1} = \frac{a_j + b_j}{2}$$

procediendo de la forma siguiente:

- Si $f(p_{j+1}) = 0$ se habrá obtenido una solución de la ecuación: el punto p_{j+1}.
- Si $f(a_j) \cdot f(p_{j+1}) < 0$ se denotará por: $a_{j+1} = a_j$ y por $b_{j+1} = p_{j+1}$.
- Si $f(a_j) \cdot f(p_{j+1}) > 0$ se denotará por: $a_{j+1} = p_{j+1}$ y por $b_{j+1} = b_j$.
- Al nuevo intervalo $[a_{j+1}, b_{j+1}]$ se le vuelve a aplicar el mismo proceso.


y
y = f(x)
f(a0)
f(P2)
P
P1
b=b0
x
a=a0
P2
f(P1)
f(b0)
L0
L1
L2

Método de Bisección

Teorema

Sea f continua en $[a,b]$, tal que $f(a)f(b)<0$. Si $[a_1,b_1],[a_2,b_2],\ldots,[a_n,b_n]$, denota los intervalos obtenidos por el método de bisección entonces existen

$$\lim_{n\to\infty} a_n \qquad \lim_{n\to\infty} b_n$$

son iguales y convergen a un cero de f . Más aún, definiendo $c_n=\frac{b_n+a_n}{2}$, $\exists \lim_{n\to\infty} c_n=\alpha$, con $f(\alpha)=0$ y se verifica

$$|\alpha-c_n|\leq\frac{b-a}{2^n}, \quad \forall n\in\mathbb{N}$$

Método de Bisección

Demostración

- Por definición se tiene que $a \leq a_1 \leq a_2 \leq \cdots a_n \leq \cdots \leq b$ luego a_n es una sucesión creciente y acotada superiormente por lo tanto es convergente. De manera análoga resulta convergente la sucesión b_n por ser decreciente y acotada inferiormente.

Método de Bisección

Demostración

- Por definición se tiene que $a \leq a_1 \leq a_2 \leq \cdots a_n \leq \cdots \leq b$ luego a_n es una sucesión creciente y acotada superiormente por lo tanto es convergente. De manera análoga resulta convergente la sucesión b_n por ser decreciente y acotada inferiormente.
- Sean $a^* = \lim_{n\to\infty} a_n$ y $b^* = \lim_{n\to\infty} b_n$. Se quiere probar que $a^* = b^*$ o lo que es equivalente que $\lim_{n\to\infty} b_n - a_n = 0$. Se observa que

$$b_n - a_n = \frac{b_{n-1} - a_{n-1}}{2} = \cdots = \frac{b_1 - a_1}{2^{n-1}} \xrightarrow{n\to\infty} 0$$

Método de Bisección

Demostración

- Definiendo $\alpha = a^* = b^*$, falta probar que $f(\alpha) = 0$. Se sabe que $f(a_n)f(b_n) \leq 0 \,\forall n \in \mathbb{N}$, luego como $f \in C([a, b])$ se tiene que

$$\underbrace{\lim_{n\to\infty} f(a_n)}_{f(\alpha)} \underbrace{\lim_{n\to\infty} f(b_n)}_{f(\alpha)} = \lim_{n\to\infty} f(a_n)f(b_n) \leq 0$$
$$\Rightarrow f^2(\alpha) \leq 0 \Rightarrow f(\alpha) = 0$$

Además

$$|\alpha - c_n| \leq \left|\frac{b_n - a_n}{2}\right| = \frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b-a}{2^n}$$

como se quería probar.

Método de Bisección

Proposición

- Si la función $f(x)$ es continua y estríctamente monótona en el intervalo $[a, b]$ y además es tal que $f(a) \cdot f(b) < 0$, dado un valor real positivo δ y denotando por N al menor número natural tal que:

$$N > \frac{\ln\left(\frac{|b-a|}{\delta}\right)}{\ln(2)}$$

se verifica que N iteraciones del proceso de bisección conducen a un valor x_{N+1} que dista de la solución de la ecuación $f(x) = 0$ una magnitud inferior a δ.

Método de Bisección

input : $a, b \in \mathbb{R}$, Máximo de iteraciones N, tolerancia TOL.
output: Solución aproximada p tal que $f(p) \approx 0$.

$i \leftarrow 1$

while $i \leq N$ **do**

  $p \leftarrow a + \dfrac{b-a}{2} = \dfrac{b+a}{2}$

  $i \leftarrow i + 1$

  if $|f(p)| < TOL \vee \dfrac{b-a}{2} < TOL$ **then**

    Salida(p); EXIT

  end

  if $f(a)f(p) > 0$ **then**

    $a \leftarrow p$

  else

    $b \leftarrow p$

  end

end

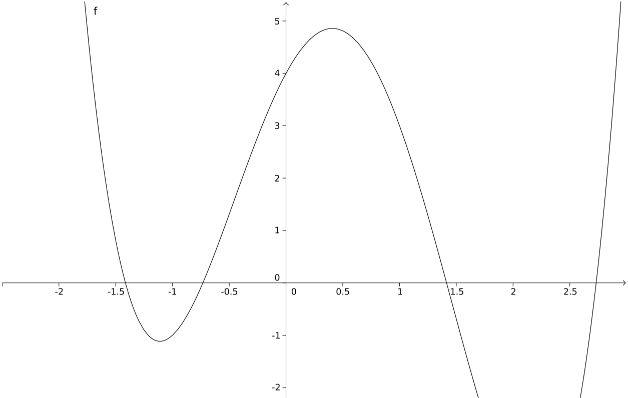
Algorithm 1: Algoritmo de Bisección.

Ejemplo

- Aplicar el método de bisección para encontrar un cero de $f(x) = x^4 - 2x^3 - 4x^2 + 4x + 4$, en el intervalo $[-2, -1]$

Ejemplo

- Aplicar el método de bisección para encontrar un cero de $f(x) = x^4 - 2x^3 - 4x^2 + 4x + 4$, en el intervalo $[-2, -1]$
- Como se observa en la gráfica, se satisfacen las hipótesis del teorema de Bolzano, por lo tanto se asegura la existencia de una valor $\alpha \in [-2, -1]$ tal que $f(\alpha) = 0$.



Ejemplo

k	a	p	b	$f(p)$	$\frac{b-a}{2}$
1	-2.00000000	-1.50000000	-1.00000000	0.81250000	1.00000000
2	-1.50000000	-1.25000000	-1.00000000	-0.90234375	0.50000000
3	-1.50000000	-1.37500000	-1.25000000	-0.28881836	0.25000000
4	-1.50000000	-1.43750000	-1.37500000	0.19532776	0.12500000
5	-1.43750000	-1.40625000	-1.37500000	-0.06266689	0.06250000
6	-1.43750000	-1.42187500	-1.40625000	0.06226259	0.03125000
7	-1.42187500	-1.41406250	-1.40625000	-0.00120812	0.01562500
8	-1.42187500	-1.41796875	-1.41406250	0.03027437	0.00781250
9	-1.41796875	-1.41601562	-1.41406250	0.01447008	0.00390625
10	-1.41601562	-1.41503906	-1.41406250	0.00661524	0.00195312
11	-1.41503906	-1.41455078	-1.41406250	0.00269963	0.00097656
12	-1.41455078	-1.41430664	-1.41406250	0.00074477	0.00048828
13	-1.41430664	-1.41418457	-1.41406250	-0.00023192	0.00024414
14	-1.41430664	-1.41424561	-1.41418457	0.00025636	0.00012207
15	-1.41424561	-1.41421509	-1.41418457	0.00001220	0.00006104
16	-1.41421509	-1.41419983	-1.41418457	-0.00010986	0.00003052
17	-1.41421509	-1.41420746	-1.41419983	-0.00004883	0.00001526

Table: Resultados Bisección.